

"Doubly enantiophobic" behavior during crystallization of racemic 1,5-dihydro-2: H -pyrrol-2-one thioether

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya 18, Kazan, Russia

Abstract

© 2018 The Royal Society of Chemistry. The titled compound **7** demonstrates unusual "doubly enantiophobic" behavior during crystallization. Namely, the mentioned substance forms two polymorphic modifications **7a** and **7b** that appear to be racemic conglomerates in the space groups P21 and P65 (or P61), respectively. Both **7a** and **7b** are thermodynamically stable at certain temperature ranges. Hence, γ -lactam **7** is prone to spontaneous resolution of the racemate into the enantiomers in two different ways, which is an exceptional phenomenon. Phase behavior and structure of the crystalline modifications of **7** were investigated by means of single crystal and powder X-ray diffraction, differential scanning calorimetry, temperature-resolved vibration spectroscopy, and hot-stage microscopy.

<http://dx.doi.org/10.1039/c8ce00369f>

References

- [1] J. Jacques, A. Collet and S. H. Wilen, *Enantiomers, Racemates and Resolutions*, Krieger Publishing Company, 1994
- [2] H. Lorenz A. Seidel-Morgenstern *Angew. Chem., Int. Ed.* 2014 53 1218 1250
- [3] L. Pérez-García D. B. Amabilino *Chem. Soc. Rev.* 2007 36 941 967
- [4] L. Leiserowitz *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* 1976 32 775 802
- [5] E. Pidcock *Chem. Commun.* 2005 3457 3459
- [6] A. Collet M. Brienne J. Jacques *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1972 1 127 142
- [7] O. Hager A. L. Llamas-Saiz C. Foces-Foces R. M. Claramunt C. López J. Elguero *Helv. Chim. Acta* 1999 82 2213 2230
- [8] L. Pérez-García D. B. Amabilino *Chem. Soc. Rev.* 2002 31 342 356
- [9] A. A. Bredikhin D. V. Zakharychev R. R. Fayzullin O. A. Antonovich A. V. Pashagin Z. A. Bredikhina *Tetrahedron: Asymmetry* 2013 24 807 816
- [10] A. A. Bredikhin D. V. Zakharychev R. R. Fayzullin Z. A. Bredikhina A. T. Gubaidullin *J. Mol. Struct.* 2015 1088 111 117
- [11] R. G. Kostyanovsky A. P. Avdeenko S. A. Konovalova G. K. Kadorkina A. V. Prosyaniuk *Mendeleev Commun.* 2000 10 16 18
- [12] R. G. Kostyanovsky I. A. Bronzova K. A. Lyssenko *Mendeleev Commun.* 2002 12 4 6
- [13] R. G. Kostyanovsky V. Schurig O. Trapp K. A. Lyssenko B. B. Averkiev G. K. Kadorkina A. V. Prosyaniuk V. R. Kostyanovsky *Mendeleev Commun.* 2002 12 137 140
- [14] P. A. Levkin K. A. Lyssenko V. Schurig R. G. Kostyanovsky *Mendeleev Commun.* 2003 13 106 108
- [15] A. N. Kravchenko G. K. Kadorkina A. S. Sigachev E. Yu. Maksareva K. A. Lyssenko P. A. Belyakov O. V. Lebedev O. N. Kharybin N. N. Makhova R. G. Kostyanovsky *Mendeleev Commun.* 2003 13 114 116
- [16] P. A. Levkin Y. A. Strelenko K. A. Lyssenko V. Schurig R. G. Kostyanovsky *Tetrahedron: Asymmetry* 2003 14 2059 2066

- [17] A. A. Bredikhin Z. A. Bredikhina D. V. Zakharychev Mendeleev Commun. 2012 22 171 180
- [18] A. A. Bredikhin A. T. Gubaidullin Z. A. Bredikhina R. R. Fayzullin A. I. Samigullina D. V. Zakharychev J. Mol. Struct. 2013 1045 104 111
- [19] R. R. Fayzullin H. Lorenz Z. A. Bredikhina A. A. Bredikhin A. Seidel-Morgenstern J. Pharm. Sci. 2014 103 3176 3182
- [20] A. A. Bredikhin D. V. Zakharychev A. T. Gubaidullin R. R. Fayzullin A. V. Pashagin Z. A. Bredikhina Cryst. Growth Des. 2014 14 1676 1683
- [21] A. R. Kurbangalieva O. A. Lodochnikova N. F. Devyatova E. A. Berdnikov O. I. Gnezdilov I. A. Litvinov G. A. Chmutova Tetrahedron 2010 66 9945 9953
- [22] L. S. Kosolapova A. R. Kurbangalieva M. F. Valiev O. A. Lodochnikova E. A. Berdnikov G. A. Chmutova Russ. Chem. Bull. 2013 62 456 463
- [23] O. A. Lodochnikova Yu. K. Voronina L. Z. Latypova D. B. Krivolapov A. R. Kurbangalieva I. A. Litvinov Russ. Chem. Bull. 2013 62 1218 1226
- [24] O. A. Lodochnikova R. M. Khakimov I. A. Litvinov L. Z. Latypova A. R. Kurbangalieva Russ. Chem. Bull. 2015 64 2444 2453
- [25] O. A. Lodochnikova L. T. Hoang A. R. Zaripova A. R. Kayumov I. A. Litvinov A. R. Kurbangalieva Russ. Chem. Bull. 2016 65 2672 2677
- [26] A. R. Kurbangalieva L. T. Hoang O. A. Lodochnikova M. Yu. Kuzmicheva A. R. Pradipta K. Tanaka G. A. Chmutova Russ. Chem. Bull. 2016 65 1278 1284
- [27] O. A. Lodochnikova, L. Z. Latypova, L. S. Kosolapova and A. R. Kurbangalieva, International Congress on Organic Chemistry, Kazan, 2011
- [28] Z. F. Chen S. F. Zhang H. S. Luo B. F. Abrahams H. Liang CrystEngComm 2007 9 27 29
- [29] S. S. Chen CrystEngComm 2016 18 6543 6565
- [30] A. Burger J. M. Rollinger P. Bruggeller J. Pharm. Sci. 1997 86 674 679
- [31] H. Simonis Chem. Ber. 1901 34 509 519
- [32] G. M. Sheldrick Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Adv. 2015 71 3 8
- [33] G. M. Sheldrick Acta Crystallogr., Sect. C: Struct. Chem. 2015 71 3 8
- [34] L. J. Farrugia J. Appl. Crystallogr. 2012 45 849 854
- [35] A. L. Spek Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr. 2009 65 148 155
- [36] H. D. Flack G. Bernardinelli J. Appl. Crystallogr. 2000 33 1143 1148
- [37] S. Parsons H. D. Flack T. Wagner Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci., Cryst. Eng. Mater. 2013 69 249 259
- [38] A. R. Kurbangalieva N. F. Devyatova A. V. Bogdanov E. A. Berdnikov T. G. Mannafov D. B. Krivolapov I. A. Litvinov G. A. Chmutova Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem. 2007 182 607 630
- [39] N. F. Devyatova L. S. Kosolapova A. R. Kurbangalieva E. A. Berdnikov O. A. Lodochnikova I. A. Litvinov G. A. Chmutova Russ. J. Org. Chem. 2008 44 1225 1232
- [40] L. Z. Latypova E. S. Saigitbatalova D. R. Chulakova O. A. Lodochnikova A. R. Kurbangalieva E. A. Berdnikov G. A. Chmutova Russ. J. Org. Chem. 2014 50 521 534
- [41] L. S. Kosolapova A. R. Kurbangalieva D. A. Kozyakov O. A. Lodochnikova E. A. Berdnikov G. A. Chmutova Butlerov Commun. 2013 36 1 11
- [42] O. A. Lodochnikova L. S. Kosolapova A. F. Saifina A. T. Gubaidullin R. R. Fayzullin A. R. Khamatgalimov I. A. Litvinov A. R. Kurbangalieva CrystEngComm 2017 19 7277 7286
- [43] R. R. Fayzullin D. V. Zakharychev A. T. Gubaidullin O. A. Antonovich D. B. Krivolapov Z. A. Bredikhina A. A. Bredikhin Cryst. Growth Des. 2017 17 271 283